

ZANICHELLI

Simonetta Klein

Il racconto della chimica

ZANICHELLI

Capitolo 9

Il modello quantistico dell'atomo

ZANICHELLI

Sommario

1. Gli orbitali atomici
2. La configurazione elettronica

Gli orbitali atomici

Un orbitale è uno strato intorno al nucleo dove è massima la probabilità che vi sia l'elettrone.

Di ogni orbitale possiamo conoscere forma, volume ed energia, che sono tutte proprietà quantizzate.

Per ricavare le proprietà quantizzate, si devono attribuire dei valori ai parametri da usare nei calcoli matematici. Tali parametri sono detti **numeri quantici**.

Gli orbitali atomici

Numero quantico principale n

Esprime il livello energetico degli elettroni di un certo orbitale.

Può assumere valori interi e positivi 1, 2, 3...fino a un valore infinito.

All'aumentare di n :

- aumenta la distanza media dal nucleo dell'elettrone
- aumenta il volume dell'orbitale
- aumenta l'energia dell'elettrone.

Gli orbitali atomici

Numero quantico secondario l

Esprime il sottolivello energetico di un dato livello.

Può assumere valori 1, 2, 3...fino a un $n - 1$.

All'aumentare di l :

- aumenta la distanza media dal nucleo dell'elettrone
- aumenta il volume dell'orbitale
- aumenta l'energia dell'elettrone.

Gli orbitali atomici

Al variare di l varia la **forma dell'orbitale**.

Per questo, a ciascun sottolivello è stata assegnata una lettera:

$l = 0$, sottolivello **s** con forma **sferica**

$l = 1$, sottolivello **p** con forma **bilobata**

$l = 2$, sottolivello **d** con forma **plurilobata**

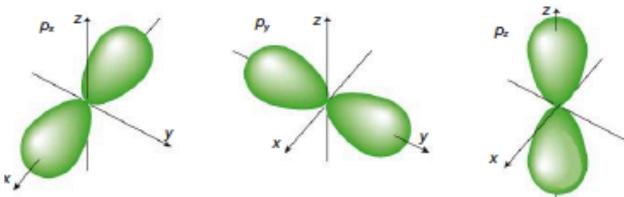
$l = 3$, sottolivello **f** con forma **plurilobata** complessa

Gli orbitali atomici

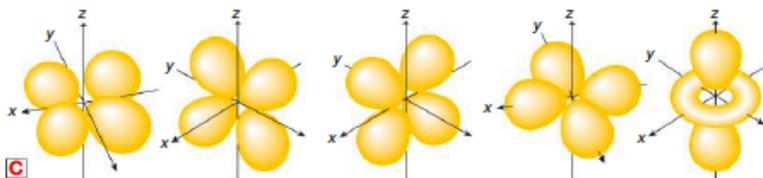
Sottolivello s



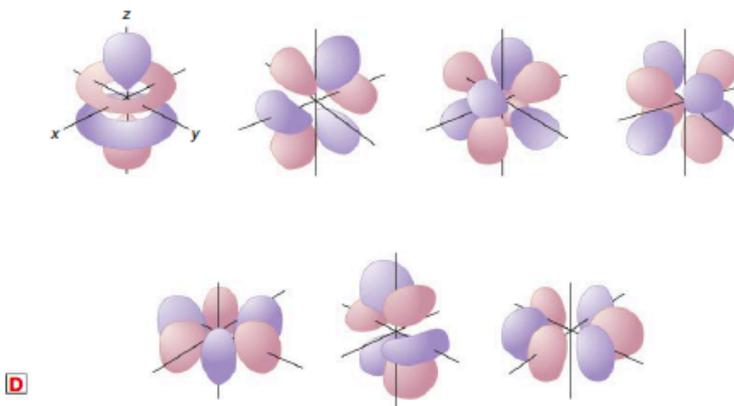
Sottolivello p



Sottolivello d



Sottolivello f



Gli orbitali atomici

Numero quantico m

Il **numero quantico magnetico**, per ogni sottolivello assume tutti i valori interi da $+l$ a $-l$.

Esprime la presenza in un dato sottolivello di orbitali con uguale energia ma orientati diversamente nello spazio.

Gli orbitali atomici

Il numero di orbitali per ogni sottolivello, quindi, è:

- sottolivello s , $l = 0$ 1 orbitale
- sottolivello p , $l = 1$ 3 orbitali
- sottolivello d , $l = 2$ 5 orbitali
- sottolivello f , $l = 3$ 7 orbitali

Gli orbitali atomici

Un elettrone che si trova su un orbitale formato da più di un lobo può occupare uno qualsiasi dei lobi, quindi non si può dire esattamente in quale lobo si trovi.

Due orbitali appartenenti allo stesso livello e allo stesso sottolivello si differenziano per diversa orientazione nello spazio, ma hanno uguale energia e uguale volume.

Gli orbitali atomici

| | | |
|-----------------|---------|--|
| Primo livello | $n = 1$ | <ul style="list-style-type: none">● sottolivello 1s – un solo orbitale con forma sferica |
| Secondo livello | $n = 2$ | <ul style="list-style-type: none">● sottolivello 2s – un solo orbitale con forma sferica (di dimensioni maggiori di 1s)● sottolivello 2p – tre orbitali con forma bilobata con uguale energia |
| Terzo livello | $n = 3$ | <ul style="list-style-type: none">● sottolivello 3s – un solo orbitale con forma sferica (dimensioni maggiori di 1s e 2s)● sottolivello 3p – tre orbitali con forma bilobata con uguale energia (dimensioni maggiori di 2p)● sottolivello 3d – cinque orbitali con forma plurilobata con uguale energia |
| Quarto livello | $n = 4$ | <ul style="list-style-type: none">● sottolivello 4s – un solo orbitale con forma sferica● sottolivello 4p – tre orbitali con forma bilobata con uguale energia● sottolivello 4d – cinque orbitali con forma plurilobata con uguale energia● sottolivello 4f – sette orbitali con forma plurilobata con uguale energia |

Gli orbitali atomici

Numero quantico di spin m_s

Distingue i singoli elettroni, può assumere solo i valori $+1/2$ e $-1/2$.

Si dice che i valori dello spin dipendono dal senso della rotazione dell'elettrone su un proprio asse.

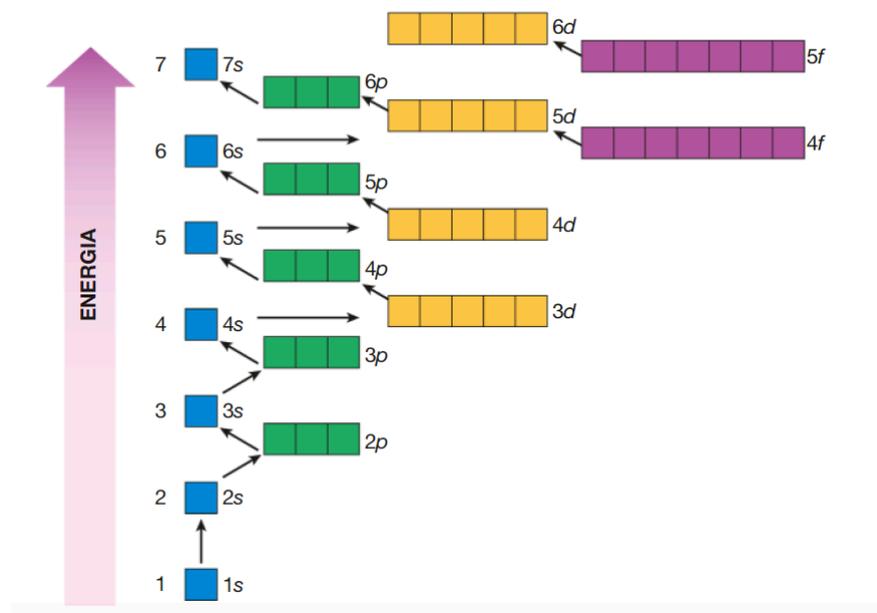
È associato al momento magnetico di ciascun elettrone e si evidenzia quando un atomo è sottoposto a un campo magnetico disomogeneo.

Nelle particelle denominate **fermioni** lo spin è semi-intero, in quelle dette **bosoni** lo spin è intero.

Gli orbitali atomici

L'**ordine di energia** dei sottolivelli che si presentano in un atomo con più di un elettrone non segue esattamente la variazione del numero quantico principale.

1s 2s 2p 3s 3p 4s 3d 4p 5s 4d 5p 6s 4f 5d 6p 7s 5f 6d 7p



Nel grafico si sono messi in evidenza anche gli orbitali di pari energia presenti in ciascun sottolivello.

La configurazione elettronica

Un atomo nel suo **stato fondamentale** è un atomo i cui elettroni si trovano nel loro stato minimo di energia, cioè non sono eccitati.

La **configurazione elettronica** è l'elenco di tutti gli orbitali dell'atomo occupati, insieme al numero di elettroni presenti in ognuno di essi.

Gli orbitali si rappresentano graficamente con dei quadratini nei quali la freccia in alto o in basso indica lo spin dell'elettrone:

orbitale **vuoto**



orbitale **semipieno**



orbitale **pieno**



La configurazione elettronica

Principio di minima energia o dell'Aufbau

I sottolivelli e i livelli energetici sono occupati in ordine di energia crescente.



La configurazione elettronica

Principio di esclusione di Pauli

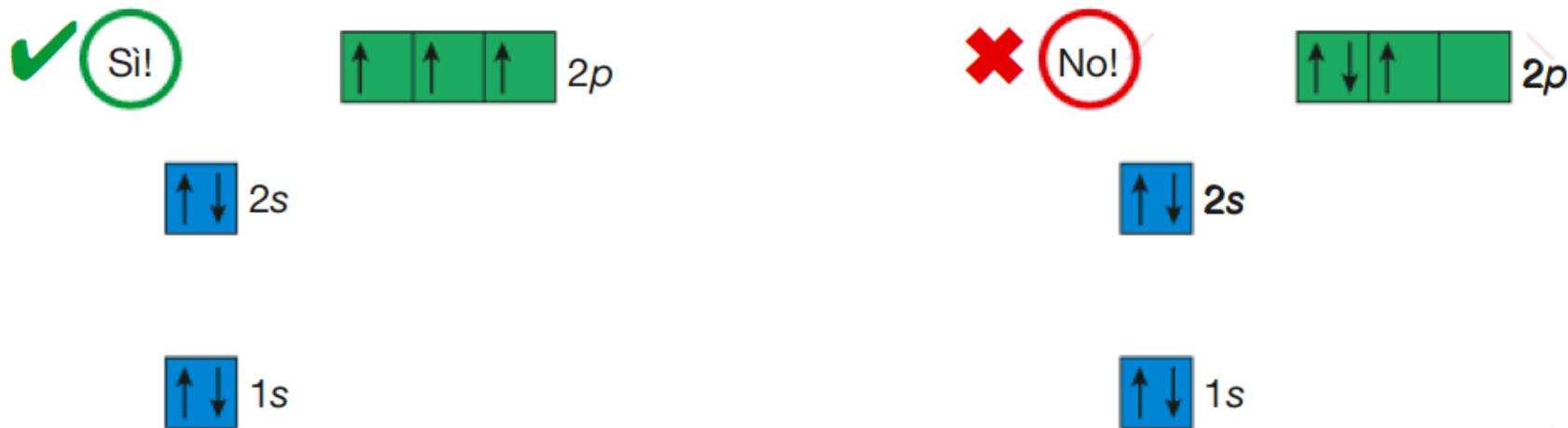
Ogni orbitale è occupato al massimo da due elettroni con spin opposto. I due spin devono essere appaiati, ovvero antiparalleli.



La configurazione elettronica

La regola di Hund

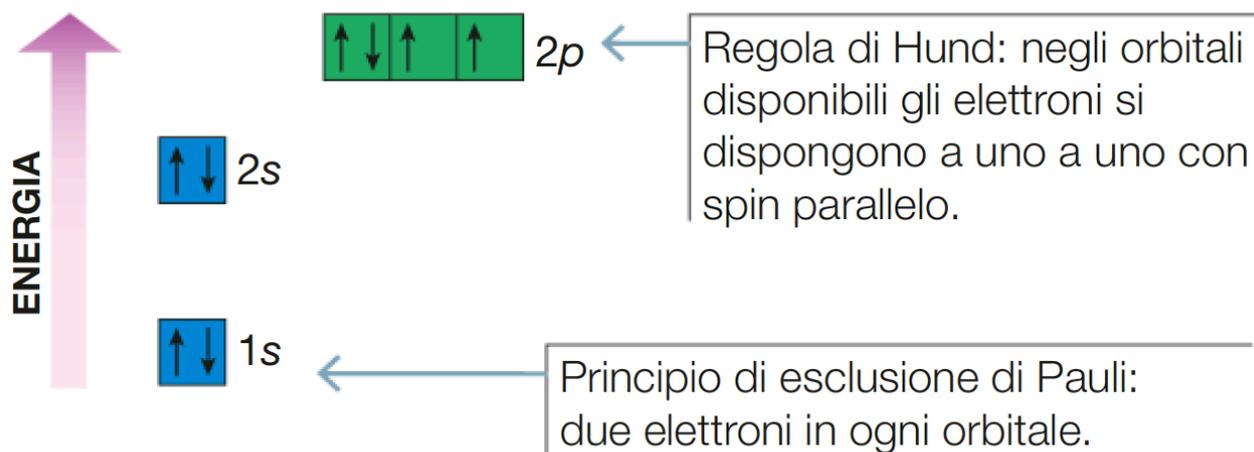
Gli elettroni di un atomo tendono a occupare orbitali disponibili di pari energia disponendosi il più possibile con spin parallelo.



La configurazione elettronica

L'ossigeno ha 8 elettroni. La sua configurazione elettronica è: $1s^2 2s^2 2p^4$.

Tenendo conto delle regole citate, la configurazione si può rappresentare così:



La configurazione elettronica

Gas nobili

Non formano quasi mai legami chimici, poiché gli elettroni sono trattenuti stabilmente. La stabilità è legata alla configurazione elettronica.

Escluso l'elio, i gas nobili completano per ultimo il sottolivello p .

Tutti i sottolivelli precedenti sono completi.

La configurazione elettronica

He (elio): $1s^2$

Ne (neon): $1s^2 2s^2 2p^6$

Ar (argon): $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$

Kr (cripton): $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10} 4p^6$

Xe (xenon): $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10} 4p^6 5s^2 4d^{10} 5p^6$

Rn (radon): $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10} 4p^6 5s^2 4d^{10} 5p^6 6s^2 4f^{14} 5d^{10} 6p^6$

Si forma una struttura simile a un guscio di elettroni disposti simmetricamente intorno al nucleo: la carica nucleare è schermata e gli elettroni di un altro atomo non ne sono attratti.

La configurazione elettronica

Metalli alcalini

I metalli alcalini sono molto reattivi e quando formano un composto cedono sempre un solo elettrone formando uno ione positivo con carica +1.

Con un elettrone in meno, l'atomo del metallo alcalino ha la stessa configurazione del gas nobile che ha il numero atomico immediatamente inferiore.

La configurazione elettronica

Metalli alcalino terrosi

Hanno due elettroni in più rispetto al gas nobile che li precede.

Formano sempre ioni con carica +2, assumendo la configurazione elettronica di un gas nobile.

La configurazione elettronica

Alogeni

Hanno un elettrone in meno rispetto ai gas nobili e formano composti acquistando un elettrone. Generano anioni con carica -1 .

Formando ioni ottengono una configurazione elettronica uguale a quella dei gas nobili.

La configurazione elettronica

Si conclude che il comportamento chimico degli atomi dei gruppi è regolato dal raggiungimento della configurazione dei gas nobili.

Si possono immaginare le configurazioni elettroniche come strati concentrici (**gusci**).

La **configurazione interna** corrisponde all'ultimo guscio completato da elettroni.

Con **configurazione esterna** o **di valenza** si intendono i gusci i cui elettroni possono essere coinvolti nei legami chimici.

La configurazione elettronica

La configurazione elettronica interna di un atomo è uguale a quella del gas nobile che lo precede e può essere espressa in breve indicando tra parentesi il simbolo del gas seguito dalla configurazione esterna degli altri elettroni.

| Nome dell'elemento | Gas nobile che lo precede (simbolo) | Configurazione di valenza |
|--------------------|-------------------------------------|---------------------------|
| Iodio | (Kr) | $5s^2, 4d^{10}, 5p^5$ |
| Calcio | (Ar) | $4s^2$ |
| Oro | (Xe) | $6s^1$ |
| Piombo | (Xe) | $6s^2, 5d^{10}, 6p^1$ |
| Ossigeno | (He) | $2s^2, 2p^4$ |
| Alluminio | (Ne) | $3s^2, 3p^1$ |
| Potassio | (Ar) | $4s^1$ |